Gültigkeitsbereich der Landau-Theorie

— Ginzburg Kriterium

Annahme beim Ginzburg-Landau-Funktional

$m(\underline{r})$ ändert sich langsam mit $\underline{r}$!

Ordnungsparameter
konkret: Magnetisierungsdichte

schließt prinzipiell die Beschreibung starker Änderungen bzw. großer räumlicher Fluktuationen des Ordnungsparameters aus

präziser: Die Fluktuationen sollten klein sein gegenüber dem Mittelwert des Ordnungsparameters!

also:

Magnetisierungsdichte

$$\underbrace{M = \int d\underline{r}\; m(\underline{r})}$$

raumgemittelte Magnetisierung

$$\boxed{\langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle \leq \langle M^2 \rangle}$$

mit $\langle M^2 \rangle = \langle \int d\underline{r}\, m(\underline{r}) \int d\underline{r}'\, m(\underline{r}') \rangle$

Betrachte translationsinvariantes System

d.h. absolute Position $\underline{r}'$ ist egal $\Rightarrow$ setze $\underline{r}' \overset{!}{=} 0$

$$\langle M^2 \rangle = \int d\underline{r}\, \langle m(\underline{r}) m(\underline{0}) \rangle \cdot V$$

$$\langle M \rangle^2 = \langle \underbrace{\int d\underline{r}\, m(\underline{r})}_{\text{const}} \rangle \langle \underbrace{\int d\underline{r}'\, m(\underline{r}')}_{\text{const}} \rangle$$

Damit kann die vorherige Ungleichung wie folgt formuliert werden:

(*)

$$\boxed{\int d\underline{r}^d \left(\langle m(\underline{r}) m(0) \rangle - \langle m(\underline{r}) \rangle \langle m(0) \rangle \right) \leq \int d\underline{r}^d \langle m(\underline{r}) \rangle \langle m(0) \rangle}$$

$$\boxed{\begin{aligned} &\langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle M^2 \rangle \\ &\quad - \langle M \rangle^2 \end{aligned}}$$

↑ Volumenintegral in d Raumdimensionen

Benutze unser früheres Resultat:

$$\langle m(\underline{r})\, m(0)\rangle - \langle m(\underline{r})\rangle\langle m(0)\rangle \sim \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2}}$$

mit ξ Korrelationslänge!

gilt asymptotisch für große r

$\Rightarrow$ Exponentieller Abfall der Korrelationsfunktion

$\Rightarrow$ Raumintegration in $(*)$ kann auf Abstände $r \leq \xi$ beschränkt werden!

(Auswertung in Kugelkoordinaten)

Damit

$$B \int_0^{\xi} dr\, r^{d-1} \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2}} \leq B\, \xi^d\, m^2$$

B ↑ Winkelfaktor (dimensionsabhängig)

mit $m = \langle m(\underline{r})\rangle = \text{const}$

benutze auch den scaling Satz:

$$m = A_m \left(\frac{|T-T_c|}{T_c}\right)^{\beta}$$

A_m: Amplitude

β ← krit. Exponent

$$\Rightarrow B \int_0^{\xi} dr\, r\, e^{-r/\xi} \le B\, \xi^d A_m \left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{2\beta}$$

Idee dahinter:
Phasenübergang 2. Ordnung
$\Rightarrow$ Magnetisierung zeigt Potenzgesetz-Verhalten direkt an T_c!

Integral auf der linken Seite umformen.

$$x = \frac{r}{\xi} \longrightarrow r = \xi x \longrightarrow \frac{dr}{dx} = \xi \Rightarrow dr = \xi\, dx$$

$$r\, dr = \xi^2 x\, dx$$

$$\to \cancel{B}\, \xi^2 \int_0^1 dx\, x\, e^{-x} \le \cancel{B}\, \xi^d \left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{2\beta} A_m$$

$$\Rightarrow \underbrace{A_m^{-1}\left(\int_0^1 dx\, x\, e^{-x}\right)}_{\text{Faktor von der Größenordnung Eins}} \xi^{2-d} \left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-2\beta} \le 1$$

$\to$ setze den Faktor $= 1$

$$\Rightarrow \xi^{2-d} \left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-2\beta} \leq 1$$

Korrelationslänge divergiert für $T \to T_c$!

benutze nun noch: $\xi \sim \left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-\nu}$

$$\Rightarrow \boxed{\left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-2\nu + d\nu - 2\beta} \leq 1} \quad (**)$$

betrachte Situation sehr dicht an T_c

d.h. $\left|\frac{T-T_c}{T_c}\right| \ll 1$

$\Rightarrow$ Für den Exponenten in (**) muss gelten:

$$d\nu - 2\beta - 2\nu \geq 0$$

Benutze jetzt die Meanfield-Resultat

$$\beta = \frac{1}{2}$$

$$\nu = \frac{1}{2}$$

$$\frac{d}{2} - 1 - 1 \geq 0$$

$$\Leftrightarrow \boxed{d \geq 4 = d_c}$$

Ginzburg-Kriterium

„untere kritische Dimension" der „Meanfield-Theorie"

- Man sieht: Meanfield-Theorie in 3 Raumdimensionen ist nicht exakt
- (Ginzburg-) Landau Näherung ist umso besser, je höher d (Raumdimension)
- Konsistent mit unserem früheren Ergebnis, nachdem die Meanfield-Näherung für ein ∞-langreichweitiges Ising-Modell exakt ist

$$H = \frac{J}{2N} \sum_{i,j} S_i S_j$$

entspricht einem Ising-Modell in unendlich vielen Raumdimensionen

Weitere Folgerung aus der Ungleichung ⊛

$\Rightarrow$ Frage: Sei d gegeben (z.B. $d=3$).

Bis zu welcher Temperatur ist die (Ginzburg-)Landau Theorie gültig?

Ausgangspunkt:

$$\left(A_m^{-1}\int_0^1 dx\, x\, e^{-x}\right)\xi^{2-d}\left(\frac{T-T_c}{T_c}\right)^{-2\beta}\leq 1$$

(Zwischenergebnis aus der vorherigen Rechnung)

benutze (wie vorher)

$$\xi = A_\xi\left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-\nu}$$

Amplitude

einsetzen

$$\left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-2\nu+d\nu-2\beta} \leq \underbrace{\left(\int_0^1 dx\, x\, e^{-x}\right)^{-1} A_m A_\xi^{-1}}_{C}$$

C hängt über die Amplituden
A_m, A_ξ vom System ab!

setze auf der linken Seite die
Meanfield-Exponenten ein:

$$\left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{\frac{1}{2}(d-4)} \leq C$$

quadriere und invertiere die Ungleichung

$$\left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{4-d} \geq C^{-2}$$

Besonders interessant: $d=3$ $\quad \left|\frac{T-T_c}{T_c}\right| \geq C^{-2}$

man definiert:

$$\tilde{\tau}_{GL} = C^{-2}$$

„Ginzburg(-Landau) Temperatur"

Aussage: Die Ginzburg-Landau-Theorie liefert „vernünftige" Beschreibung (d.h. $\beta = \frac{1}{2}$, $\nu = \frac{1}{2}$, Korrelation $\sim \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2}}$ etc.)

solange: $\left| \frac{T - T_C}{T_C} \right| \geq \tilde{\tau}_{GL}$ ← system abhängig

In manchen Systemen ist $\tilde{\tau}_{GL}$ extrem klein, so daß es mit Experimenten fast unmöglich ist, so dicht an T_C heranzukommen, daß man Abweichungen vom Meanfield-Verhalten mißt!

Beispiele: Fluide System mit Coulomb-Wechselwirkung $u(r) \sim \frac{1}{r}$

hier ist $\tilde{\tau}_{GL} \sim 10^{-4}$

(zum Vergleich: kurzreichweitige Ferromagnete: $\tilde{\tau}_{GL} \approx 10^{-2}$)

V. Klassische Dichtefunktionaltheorie (DFT)

- „state-of-the-art" Theorie

  zur Berechnung der Strukturen in inhomogenen Flüssigkeiten

  z.B. • Flüssig-Gas-Grenzfläche
  - • Strukturen von Fluiden an Wänden und in Nanoporen
  - • Strukturen in ungeordneten Materialien

- konzeptionell enge Verwandtschaft zur elektronischen DFT, außer dass es hier nicht um die Elektronendichte, sondern um die (klass.) Teilchendichte in einem Fluid geht

• Weitere Anwendungen der klass. DFT:

- Lokalisierung von Phasenübergängen

  z.B. Phasenübergang flüssig-fest!

– inzwischen auch Verallgemeinerung der klass. DFT auf dynamische Phänomene!

V.1. Grundlagen

entscheidende Größe: $$\rho(\underline{r}) = \Big\langle \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)}_{\hat{\rho}(\underline{r})} \Big\rangle$$

mikroskopische „Dichteoperator"